

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

Этап 3. Комплексы программ. Описание
программной реализации проекта.

Работу выполнили студентки НПИбд-02-18

Бурба А. В., Крючкова В. М., Никитаева А. С.,

Фогилева К. М., Шапошникова А. С.

Пару шагов назад



Подготовка

$$\sum E_k = \frac{T(2N - 3)k}{2}$$



$$E_k = \frac{T(2N - 3)k}{2}$$

Программа

```
import math

import matplotlib.pyplot as plt

to = 1000

tmax = 2348

dt = 10

t = np.arange(to, tmax, dt)

N1 = 7

N2 = 19
```

```
def Ek(N, t):

    ek = (t*(2*N-3) *1.380649*pow (10, -
23))/2

    return ek

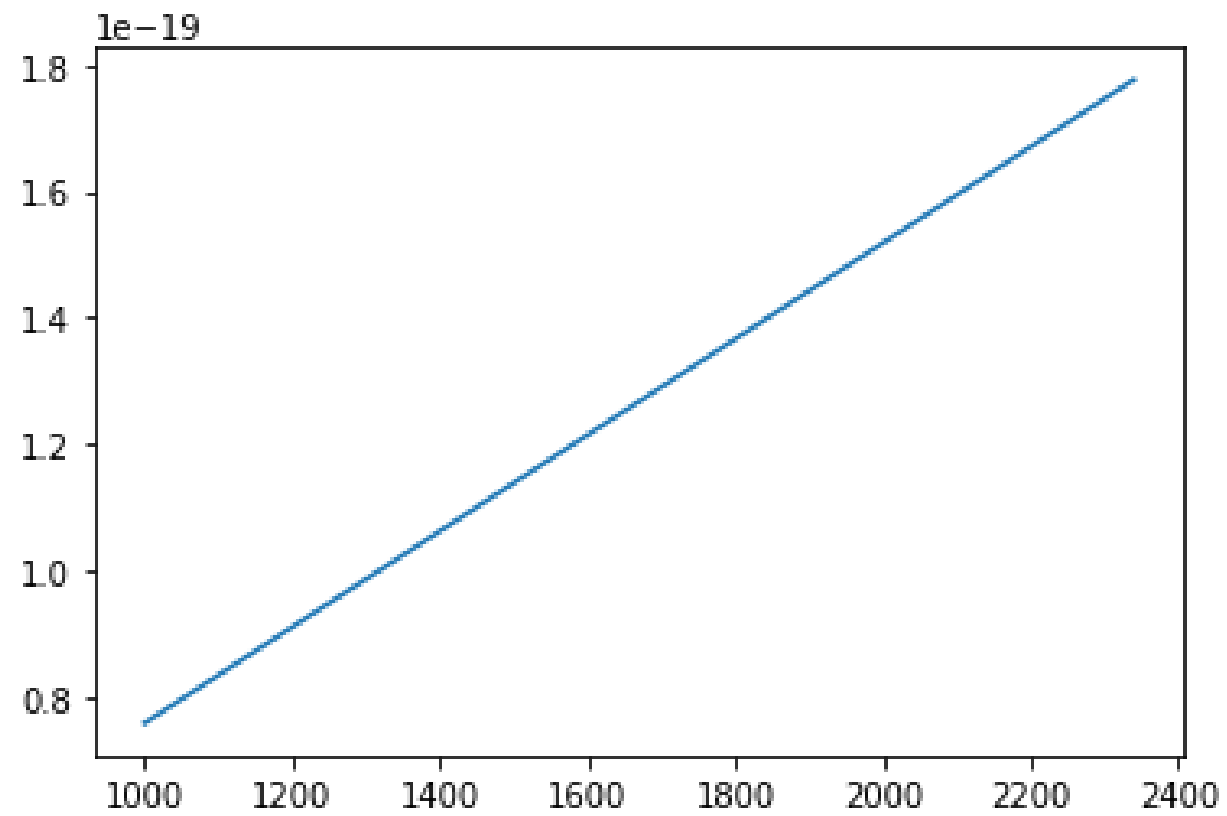
e1 = Ek(N1, t)

e2 = Ek(N2, t)

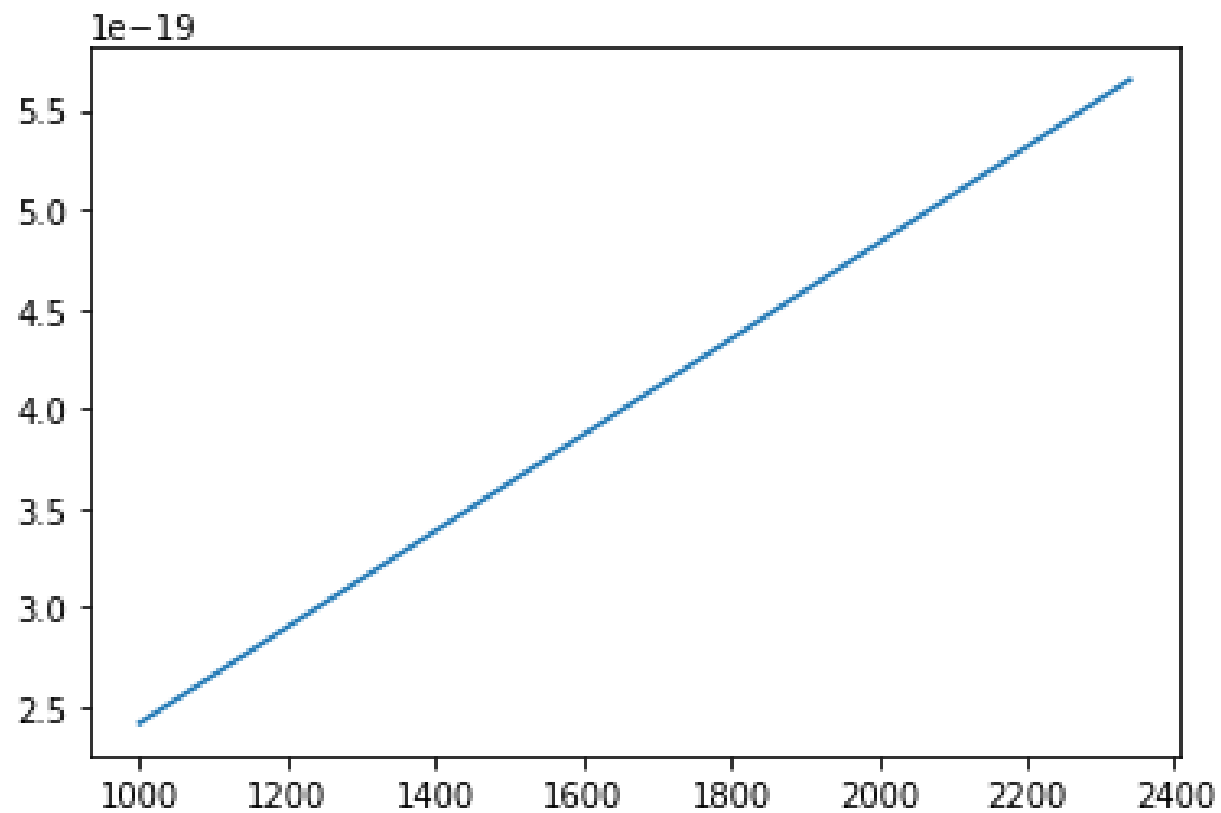
plt.plot(t, e1)

plt.plot(t, e2)
```

Кластер с N=7



Кластер с N=19



Выводы



**СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ!**